

На правах рукописи



АЛЕХИН Александр Павлович

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ И ДИНАМИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ САМОПОДОБНЫХ КЛАСТЕРОВ

01.04.02 – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань – 2012

Работа выполнена на кафедре теоретической физики ФГАОУ ВПО «Казанский (Приволжский) Федеральный Университет».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Нигматуллин Равиль Рашидович

Официальные оппоненты:

Учайкин Владимир Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор,
Ульяновский Государственный Университет, заведующий кафедрой теоретической
физики

Мокшин Анатолий Васильевич, кандидат физико-математических наук, доцент,
Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Институт Физики,
заведующий кафедрой вычислительной физики и моделирования физических
процессов

Ведущая организация: Казанский национальный исследовательский
технический университет им. А.Н. Туполева.

Защита состоится 25 мая 2012 г. в 14 час. 40 мин. на заседании диссертационного
совета Д 212.081.15 при Казанском (Приволжском) федеральном университете по
адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлёвская, д. 18а, физический факультет,
аудитория ____.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке имени Н.И.
Лобачевского Казанского (Приволжского) Федерального Университета.

Автореферат разослан «__» апреля 2012 г.

Учёный секретарь

диссертационного совета



Ерёмин М.В.

Общая характеристика работы

Работа посвящена исследованию геометрических и динамических свойств самоподобных кластеров. Разработанные модели представления (методы параметризации) кластеров позволили применить квазифрактальный подход к их анализу и отыскать параметры, чувствительные к изменению заданных свойств системы, в которой эти кластеры были выращены. Так же в работе исследована взаимосвязь статистически самоподобного распределения зарядов/диполей на поверхности твердого тела (подложке) с особенностями электростатического потенциала вблизи нее, и предложен метод нахождения параметров этого распределения по известному электростатическому потенциалу вблизи подложки. Результаты компьютерного моделирования количественно согласуются с аналитическими расчетами.

Актуальность темы

Физика твердого тела и статистическая физика исследует в основном свойства макроскопических систем, используя т.н. термодинамический предел, предполагающий, что объем V и число частиц N в системе стремятся к бесконечности при постоянной плотности $n = N/V$. Такое приближение позволяет найти большинство «объемных» характеристик системы.

Микроскопические объекты, например, электроны в атоме водорода, описываются квантовой механикой. В квантовой механике состояние частицы характеризуется волновой функцией ψ , определяемой из уравнения Шредингера.

Исследование же систем промежуточного размера (такой размер определяют как «мезоскопический» [1]) представляет интерес не только для ответа на вопрос: каким образом достигается термодинамический предел при последовательном увеличении размера системы от молекулы до массивного образца? Существует много явлений, которые присущи только мезоскопическим системам. Мезоскопические системы в действительности похожи на большие молекулы, но они всегда, по крайней мере, слабо, связаны (посредством фононов, многочастичных возбуждений и т.д.) с гораздо большими (по существу – бесконечными) системами. Иногда силу этой связи можно контролировать, и, в идеале, было бы интересно проследить, как меняются различные характеристики системы при последовательном изменении силы связи от случая почти невзаимодействующей (слабо-коррелированной) до сильно взаимодействующей (сильно-коррелированной) системы.

Основной трудностью при исследовании таких систем является то, что они содержат слишком большое количество атомов (10^6 - 10^9), чтобы задачу можно было решить напрямую, используя методы квантовой механики.

Эту проблему можно решить переходом к феноменологическому рассмотрению исследуемой системы, посредством введения потенциалов взаимодействия между ее структурными единицами и дополнительных предположений об их геометрии. Так, например, предположение о том, что неупорядоченная среда состоит из сильно-коррелированных фрактальных кластеров, слабо взаимодействующих друг с другом, позволило объяснить многие

особенности диэлектрических спектров сложных веществ в широком диапазоне частот [2].

Прямые эксперименты и компьютерное моделирование [11-13] показали, что кластеры, образующиеся в процессах агрегации частиц, обычно обладают самоподобной структурой, хотя встречаются и отклонения [9]. В свою очередь, геометрические свойства самоподобных объектов описываются с помощью фрактальной геометрии – отрасли математики, которая стала активно развиваться после фундаментальных работ Бенуа Мандельброта [5-8]. В настоящее время область применения фрактальной геометрии постоянно расширяется [3, 4]. В рамках этих представлений основным параметром, характеризующим масштабно-инвариантные свойства фрактального объекта, является его размерность Хаусдорфа-Безиковича, которая в отличие от топологической размерности, как правило, является нецелым числом.

Обращаясь к проблеме исследования самоподобных кластеров, важно отметить, что процесс агрегации частиц является неравновесным и взаимодействие их друг с другом, с растущим кластером, а также влияние внешних факторов отражается на особенностях геометрии получаемого кластера. К сожалению, фрактальная размерность не всегда оказывается чувствительной к изменению параметров системы, что потребовало построения модели кластера, в которой существует параметр чувствительный к изменению заданного фактора системы (взаимодействия между частицами, температуры, плотности и т.п.). Такой подход позволил рассматривать кластер как «маркер» заданного фактора системы.

Наряду с фрактальными агрегатами особое внимание уделяется свойствам диэлектрических тонких пленок, создаваемых на поверхности твердого тела (подложке). Для анализа структуры таких пленок широко применяются методы сканирующей зондовой микроскопии [16], однако чтобы определить статистические характеристики поверхности необходимо проводить фрактальный анализ изображений. Хотелось бы иметь в распоряжении метод, позволяющий напрямую получать значения этих параметров, например, измеряя электростатическое поле вблизи поверхности. Такое поле может создаваться зарядами или диполями, нанесенными каким-либо образом на нее [14, 15]. Мы нашли только две работы [17, 18], в которых авторы рассматривают эту задачу, но они заменяют реальную дискретную структуру непрерывной из-за чего теряется логопериодическая часть решения.

Несомненно, что расширение возможностей анализа самоподобных кластеров, посредством применения квазифрактального подхода, а также исследования взаимосвязи между геометрией распределения зарядов/диполей и потенциалом, который они создают, представляет собой актуальную задачу.

Цель работы

Целью представленной работы является исследование геометрических и динамических свойств самоподобных кластеров. Были поставлены следующие задачи: 1) проверить применимость квазифрактального представления для анализа геометрической структуры широкого класса неупорядоченных систем на модельных данных; 2) подтвердить аналитически и проверить численно гипотезу о том, что самоподобная система электрических зарядов создает электростатический

потенциал, содержащий слагаемое с нецелым (дробно-степенным) показателем степени.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Показано, что применение квазифрактального подхода, основанного на построении модели кластера, в которой присутствует параметр, чувствительный к изменению условий его роста, существенно расширяет возможности анализа неупорядоченных систем.
2. Разработанные модели представления кластеров позволяют количественно анализировать влияние факторов роста кластеров на особенности их геометрии.
3. Показано, что самоподобное распределение зарядов/диполей на поверхности твердого тела (подложке) создает вблизи нее электростатический потенциал, содержащий произведение дробно-степенной функции на функцию, периодическую в логарифмических координатах

Научная новизна результатов заключается в следующем:

- подтверждена применимость квазифрактального представления для анализа геометрической структуры широкого класса неупорядоченных систем;
- разработаны модели представления кластеров, позволяющие количественно анализировать влияние факторов роста кластеров на их геометрические особенности;
- показано, что самоподобное распределение заряда/диполей на поверхности твердого тела (подложке) создает вблизи нее электростатический потенциал, содержащий произведение дробно-степенной функции на функцию, периодическую в логарифмических координатах;
- предложен подход к анализу статистически самоподобного распределения зарядов/диполей на поверхности твердого тела, основанный на заданном электростатическом потенциале вблизи этой поверхности.

Научно-практическая значимость результатов диссертации

Научно-практическая значимость работы состоит в том, что удалось подтвердить применимость квазифрактального подхода для анализа неупорядоченных систем. В этом случае вместо единственного параметра, характеризующего геометрические свойства кластеров – фрактальной размерности в зависимости от выбранной параметризации получается набор параметров. Среди этого набора присутствует параметр, чувствительный к изменению заданного внешнего фактора, к которому можно отнести: потенциал межчастичного взаимодействия, температуру системы, плотность, массу частиц и т.д. Тем самым, кластер становится «маркером» заданного фактора системы. Выбор параметризации является произвольным и определяется исходя из наличия чувствительного параметра.

Также было показано, что самоподобная геометрия распределения зарядов/диполей на поверхности твердого тела порождает электростатический потенциал, содержащий произведение дробно-степенной функции на функцию, периодическую в логарифмических координатах, причем на расстоянии меньшем типичного размера кластеров это слагаемое дает ведущий вклад в потенциал.

Предложен способ определения статистических параметров самоподобного распределения зарядов/диполей на поверхности твердого тела, например, в тонких пленках по известному потенциалу вблизи нее.

Мы надеемся, что данная работа окажется полезной для специалистов, занимающихся созданием и анализом тонких пленок с заданными свойствами, а также тем, кто интересуется спецификой протекания различных химических реакций на поверхностях катализаторов.

Апробация работы

Основные результаты работы были доложены на следующих конференциях: пятой международной конференции «Нелинейная динамика» (Нидерланды, Эйндховен, 2005); пятом международном междисциплинарном симпозиуме «Фракталы и прикладная синергетика в нанотехнологиях»; Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых учёных (г. Уфа, 2008 г.); итоговой научно-образовательной конференции студентов Казанского государственного университета (г. Казань, 2008 г.); международной конференции «Нелинейная наука и сложные системы» (Турция, Анкара, 2010).

Личный вклад автора

Постановка задач принадлежит научному руководителю. Все решения задач, изложенные в диссертации, выполнены соискателем.

Публикации. Основное содержание работы отражено в 11 научных публикациях.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы. Объем работы – 100 страниц печатного текста, включая 58 рисунков, 3 таблицы и библиографию из 68 наименований.

Основное содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность выбранной темы, формируются цели и задачи диссертации, даётся общая характеристика работы и её составных частей, а также приводится список основных публикаций и тезисов по работам конференций.

В **первой** обзорной главе даны основные понятия, формулы и выражения, используемые в диссертации. Приводятся методы вычисления фрактальной размерности и спектра размерностей и применение их для анализа геометрических свойств неупорядоченных систем.

Во **второй** главе предлагается новый подход к анализу неупорядоченных систем (самоподобных кластеров), основанный на применении квазифрактального формализма. *Квазифракталы* – это новый тип самоподобных объектов, обладающих более медленным (логарифмическим) подобием, в отличие от фракталов.

Процессы роста агрегатов в газовой фазе металлов, коллоидных растворах; в тонких пленках на поверхности твердого тела (подложке) и т.п. являются неравновесными и приводят к образованию самоподобных кластеров. Обычно для

анализа структуры этих объектов прибегают к помощи фрактальной геометрии. В качестве основного параметра используется фрактальная размерность (D) или спектр размерностей $f(\alpha)$. В первом случае для получения значения D используют соотношение «число частиц – радиус» (1), которое связывает размер кластера с числом частиц, которые его составляют. Под размером кластера обычно понимают радиус наименьшей сферы, содержащей в себе все частицы кластера.

$$N(R) \propto (R/R_0)^D, \quad (1)$$

где R – размер кластера, N – число частиц (мономеров) кластера, R_0 – радиус мономеров.

Очевидно, что изменение параметров системы (температуры, плотности частиц, потенциала межчастичного взаимодействия и т.п.) приводит к изменению в геометрии получаемых кластеров. Это должно отражаться на величине фрактальной размерности, однако D не всегда является параметром, чувствительным к изменению свойств системы. Аналогичная картина наблюдается и в случае спектра размерностей. В общем случае, если в системе имеется n управляющих параметров, то нам необходимо не менее n подгоночных параметров, чтобы связать геометрию кластера со свойствами системы, в которой он был выращен. Таким образом, кластер рассматривается как «маркер» этой системы.

Для применения квазифрактального формализма необходимо построение модели кластера (его параметризации), в которой имеется параметр, чувствительный к изменению заданного свойства системы.

В первой части главы рассматривается применение этого подхода для анализа плоских кластеров, формируемых в процессе ограниченной диффузией агрегации (ОДА) [10] как на решетках разных типов (рис. 1, а), так и в сплошной среде (рис. 1, б). Параметризация кластеров основывается на введении понятия «координационной сферы». Под координационной сферой понимается тонкий сферический слой радиуса $r(j)$, содержащий, обычно, небольшое число частиц $n(j)$, где j – номер координационной сферы. Результаты подгонки в дважды логарифмических координатах выражений $R(j) = r(j)$ и $N(j) = \sum_{j=0}^j n(j)$ для различных типов кластеров приведены на рис. 2. Видно, что за исключением области наиболее близкой к затравочной частице зависимости хорошо аппроксимируются степенными функциями $N(j) = Aj^\alpha$ и $R(j) = Bj^\beta$, в результате чего мы получаем не один параметр (фрактальную размерность), а четыре параметра, связанных с геометрией кластера.

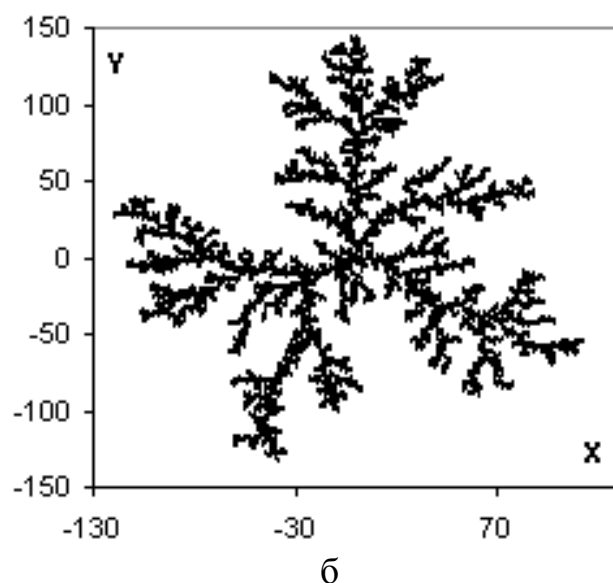
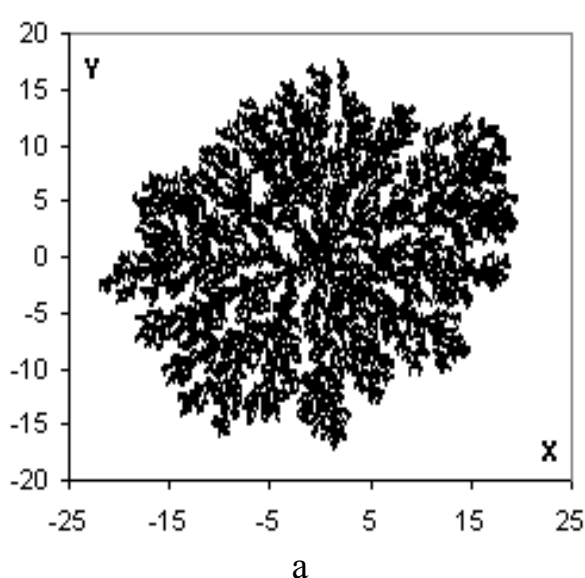


Рисунок 1. Пример кластера, полученного в рамках модели ОДА (слева). Кластер, полученный на сотовой решетке (справа). Затравочные частицы расположены в центрах кластеров, в точках с координатами (0;0).

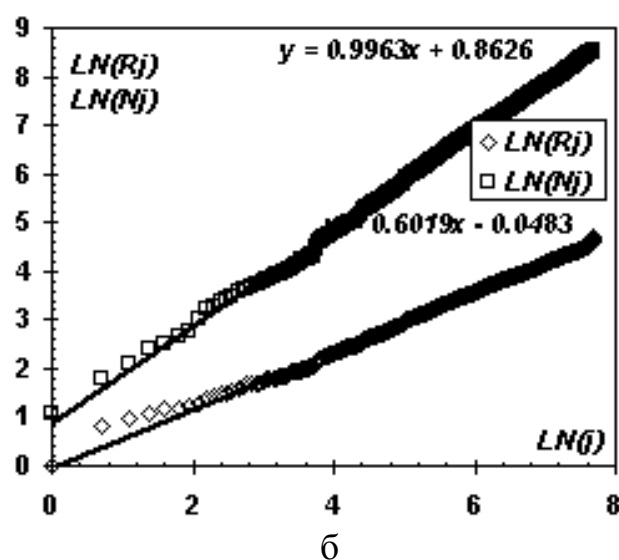
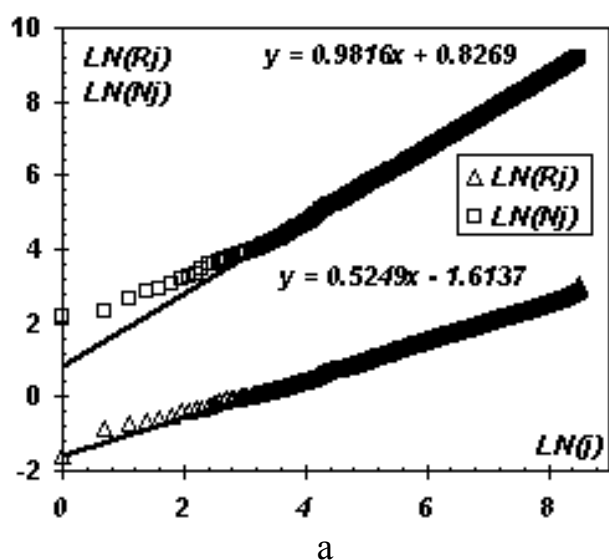


Рисунок 2. Пример анализа кластера, полученного в модели ОДА, в дважды логарифмических координатах после его параметризации (слева). Пример анализа кластера, полученного на треугольной решетке (справа). Полученные зависимости в дважды логарифмических координатах хорошо аппроксимируются прямыми, за исключением области малых значений j , соответствующей внутренней сильно флуктуирующей части кластера.

Во второй части главы квазифрактальный подход применяется к кластерам, формируемым в модели плоской полярной жидкости, в которой присутствуют тяжелые ионы. Кластером являются диполи, которые группируются вокруг иона под действием кулоновских сил, что приводит к появлению радиальной неоднородности в плотности распределения частиц (рис. 3, а).

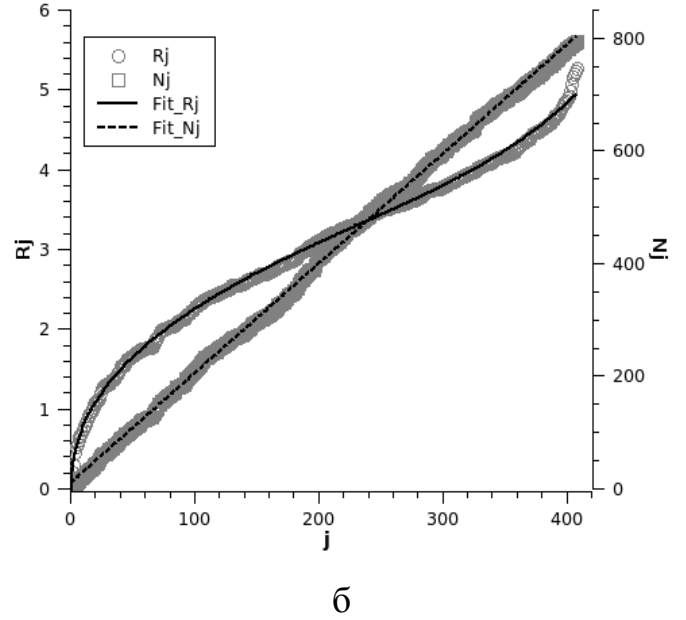
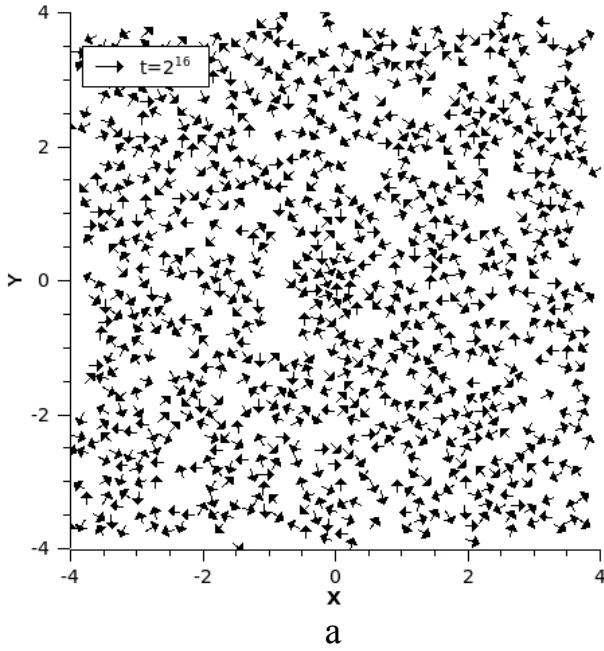


Рисунок 3. Распределение частиц спустя 2^{16} шагов образуется искомый кластер. На рисунке прослеживается радиальная симметрия в расположении частиц. Ввиду «сильного» межчастичного взаимодействия эти кластеры не так наглядны как, например, кластеры полученные в рамках модели ОДА (слева). Результат подгонки модельных данных $R(j)=r(j)$ и $N(j)=\sum_{j=0}^j n(j)$ методом собственных координат [19]. Подгоночные функции, показанные на этом рисунке сплошной линией имеют вид $N(j)=1.97j+13.62$, $R(j)=-0.084j^{-0.47}+0.292j^{0.44}+3\cdot 10^{-16}j^{5.89}$ (справа).

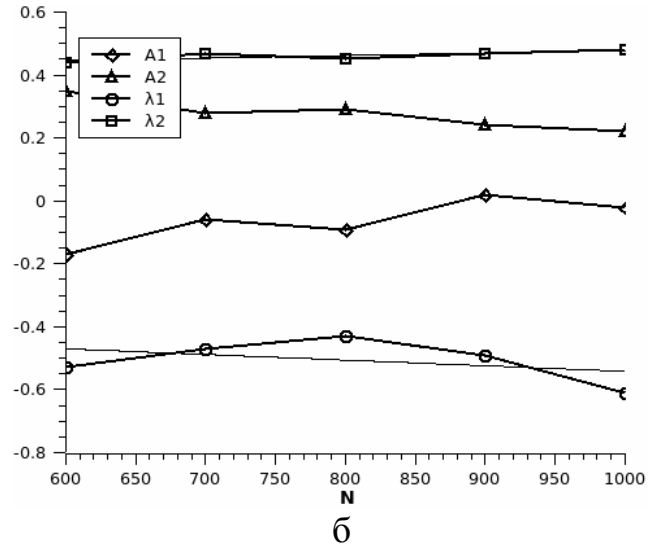
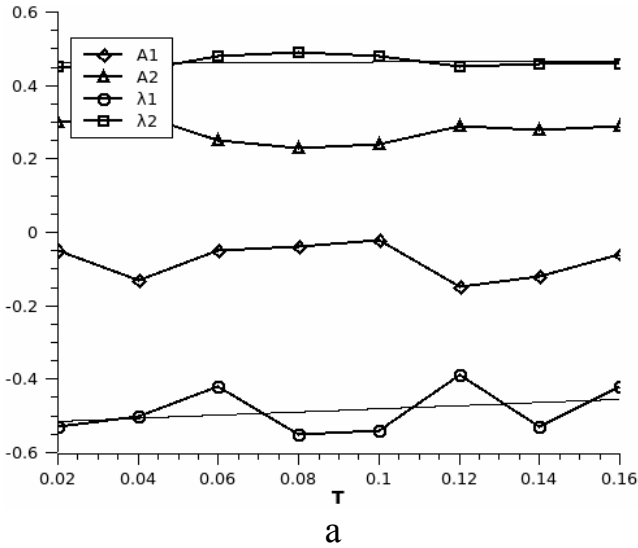


Рисунок 4. Температурная зависимость подгоночных параметров и линейная аппроксимация некоторых из них (слева). Плотностная зависимость подгоночных параметров. $N=800$ соответствует объемной плотности 0.4 (справа).

Из рис. 4, а видна общая картина изменения степенных показателей λ_1, λ_2 с увеличением температуры, а именно: показатель λ_1 , соответствующий внутренней части кластера, растет с возрастанием температуры. В результате чего непосредственное влияние центрального иона распространяется на все большее число диполей, то есть увеличивается область с «ближайшими» диполями. Вместе с тем величина параметра λ_2 , соответствующего внешней части кластера, остается

почти неизменной. На рис. 4, б показатель λ_2 ведет себя аналогично, а λ_1 убывает с увеличением плотности. Это объясняется тем, что возрастает число диполей, находящихся вблизи иона, и «внутренняя» часть кластера как бы сжимается. Таким образом, введенный в систему диполей ион не только служит затравкой кластера, но и модулирует его масштабно-инвариантные свойства в зависимости от внешних условий.

В третьей части главы рассматриваются кластеры, формируемые частицами, между которыми также существует диполь-дипольное взаимодействие, но присоединение к кластеру является необратимым. В этом смысле, рассмотренная модель аналогичная ОДА, в которой затравочная частица обладает электрическим зарядом, а блуждающие – дипольным моментом. Для этой модели применяется иной метод параметризации, основанный на разбиении кластера по поколениям частиц. Нулевому поколению принадлежит затравочная частица. К первому поколению $g = 1$ относятся частицы $n(1)$, которые присоединились к затравочной. Ко второму поколению $g = 2$ те $n(2)$, что присоединились к частицам первого, и т.д. Таким образом, кластер разбивается на оболочки, содержащие все возрастающие число частиц. Радиус такой оболочки $r(g)$ определяется как среднее расстояние ее частиц до затравочной.

Поколение всего кластера определяется частицей с максимальным g .

Анализ зависимостей $r(g)$, $n(g)$, g_{\max} , $R(g_{\max})$, $N(g_{\max})$ показал, что, используя этот вид параметризации, легко выделить области, в которой построение кластера уже почти завершено и в которой оно еще активно продолжается (рис. 5, а). Зависимость для $r(g)$ оказывается линейной, в то время как для $n(g)$ – степенной для внутренней области кластера.

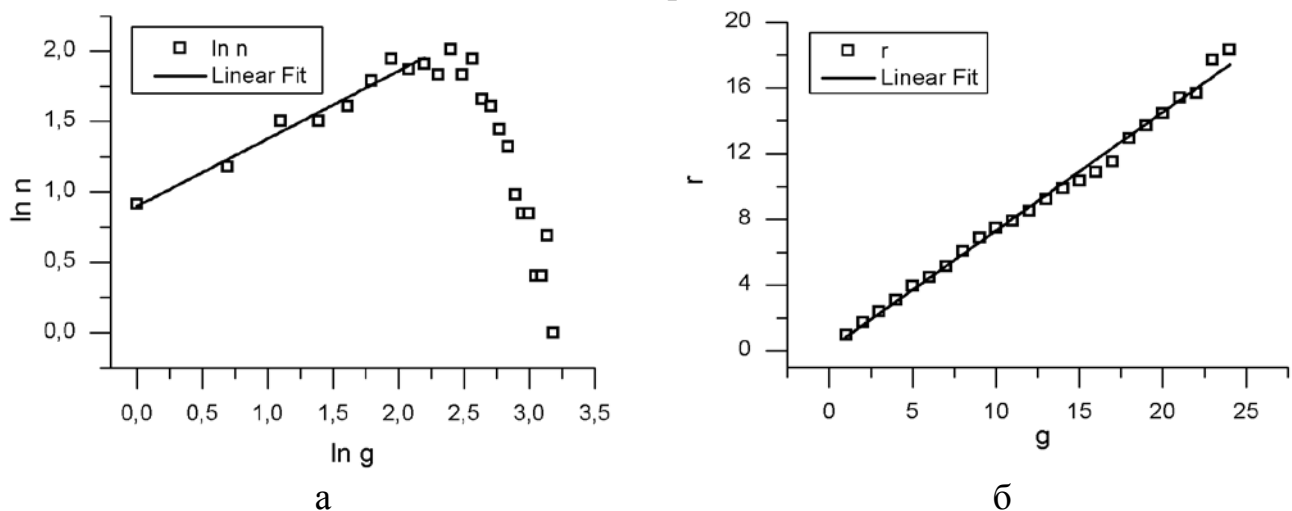
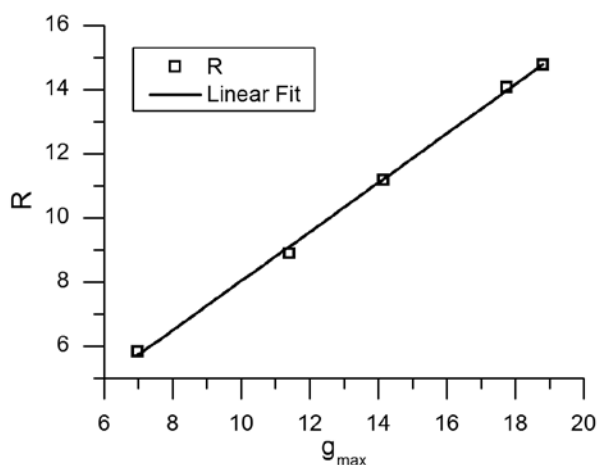
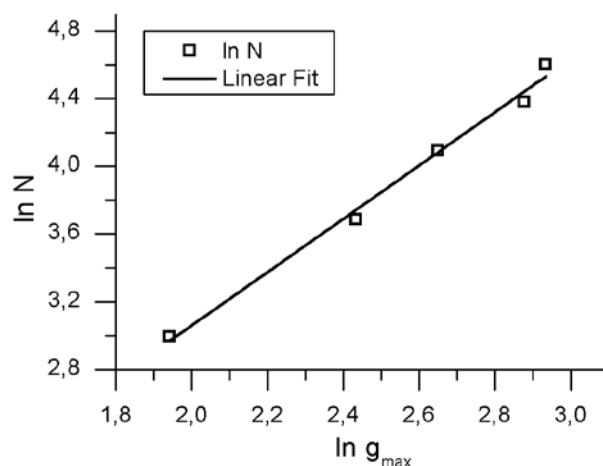


Рисунок 5. Зависимость числа частиц, относящихся к заданному поколению от номера поколения (а). До некоторого поколения ($g < g_{n_max}$) наблюдается степенной рост (наклон = 0,48), после чего плавный спад ($g > g_{n_max}$). Мы полагаем, что в области поколений $g < g_{n_max}$ построение кластера уже в основном завершено, а при $g > g_{n_max}$ активно продолжается. Зависимость среднего расстояния для частиц, принадлежащих заданному поколению (б), от номера поколения. Зависимость носит линейный характер (наклон = 0,72).

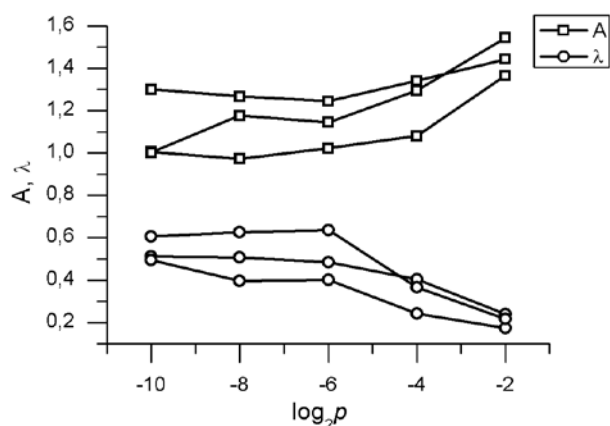


а

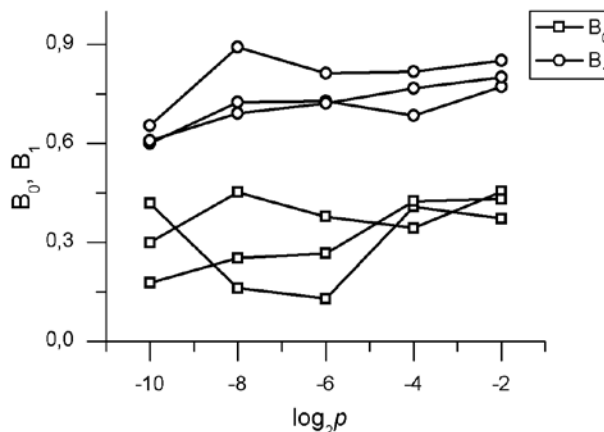


б

Рисунок 6. Интегральные характеристики кластеров $R(g_{\max})$ и $N(g_{\max})$, где g_{\max} - поколение кластера, R - радиус минимальной сферы, содержащей в себе все частицы кластера, N - число частиц кластера. Для $R(g_{\max})$ получается линейная зависимость, аналогичная зависимости для $r(g)$, в свою очередь, для $N(g_{\max})$ в дважды логарифмических координатах получается прямая, так же как и для $n(g)$. Показатель степени зависимости $N(g_{\max})$ был найден из линейной подгонки в дважды логарифмических координатах. Он оказался равен $1,44 \pm 0,2$, что на единицу больше, чем для зависимости $n(g)$, и в пределах погрешности соответствует фрактальной размерности, полученной различными методами.



а



б

Рисунок 7. Динамика изменения подгоночных параметров для выражений, полученных в результате параметризации соотношения (1). В результате получились следующие выражения $n(g) = A_1 g^\lambda$, $r(g) = B_0 + B_1 g$. а) показатель степени λ и коэффициент при степенной функции A , б) коэффициент B_1 и свободный член B_0 . Кривые даны для трех температур. По оси Ox отложен логарифм по основанию 2 обезразмеренного дипольного момента свободных частиц.

Показатель степени в выражении для $n(g)$ уменьшается с ростом дипольного момента, что обусловлено увеличением градиента энергии взаимодействия

свободной частицы и кластера. Действительно, при увеличении дипольного момента свободной частицы растет сила взаимодействия частицы с кластером. Это приводит к уменьшению вероятности движения частиц от кластера, их траектории становятся менее извилистыми. Частицам легче присоединиться к периферии, чем проникнуть вглубь кластера. Это приводит к уменьшению количества частиц, присоединяемых к конкретной выбранной частице кластера.

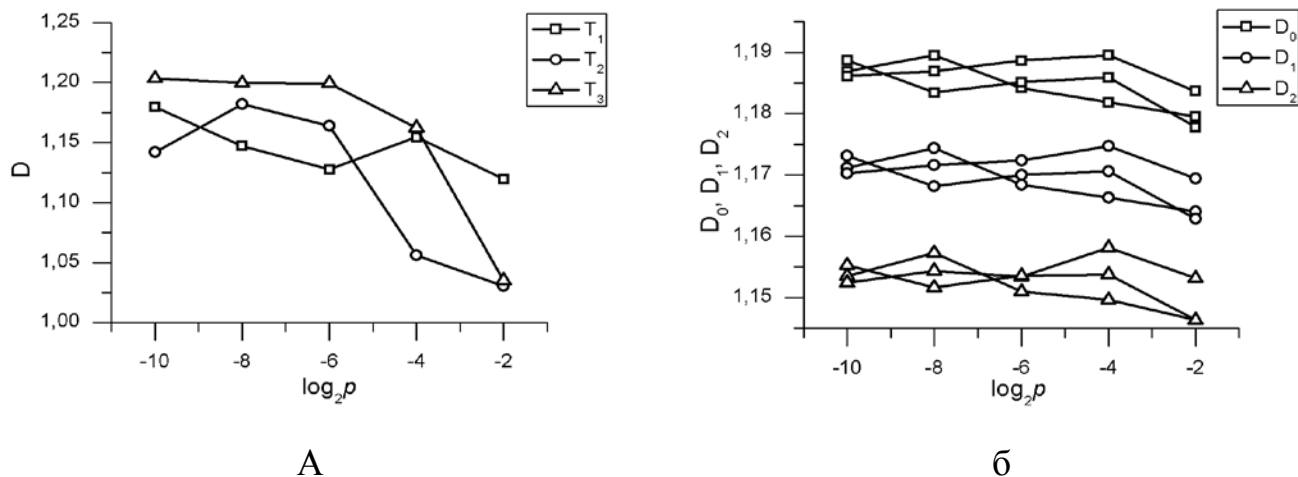


Рисунок 8. На рисунке приведены значения размерностей кластеров, полученные с помощью соотношения «число частиц-радиус» (слева) и из спектров фрактальной размерности (справа). Тенденция изменения фрактальной размерности при изменении дипольного момента свободных частиц нечеткая из-за погрешности определения самой размерности, поэтому ничего конкретного о том, что происходит в системе сказать нельзя.

Размерности, полученные двумя различными методами: с помощью соотношения «число частиц – радиус» и спектра фрактальных размерностей (рис. 8) близки друг к другу (относительное отклонение составляет около 10 %). Динамика изменения в обоих случаях довольно слабая, поэтому, глядя на эти кривые, нельзя точно сказать, что происходит в исследуемой системе.

Предложенный подход, основанный на построении модели кластера, оказался достаточно эффективным при анализе влияния изменения заданного свойства системы (дипольного момента частиц), в которой происходит рост кластеров, на их геометрию.

Выбор параметризации (модели кластера) является произвольным и определяется исходя из наличия подгоночного параметра, чувствительного к изменению заданного фактора системы.

В главе 3 решается задача вычисления электростатического потенциала вблизи поверхности твердого тела (подложке), создаваемого самоподобным распределением заряда/диполей на ее поверхности.

В первой части главы рассматривается потенциал, создаваемый системой N концентрических заряженных колец, расположенных в горизонтальной плоскости (рис. 9) и представляющих собой упрощенную модель плоского дендритного кластера. Требование того, чтобы распределение заряда в такой системе было самоподобным (радиус и заряд колец подчиняются соотношениям: $r_n = r_0 \xi^n$,

$e_n = e_0 b^n$), позволяет записать функциональное уравнение для потенциала этой системы

$$\Phi(\xi r) = \frac{b}{\xi} \Phi(r) + \Phi_0(\xi r) - \Phi_N(\xi r), \quad (2)$$

где r – радиус-вектор, проведенный из начала координат в точку P верхнего или нижнего полупространства; b и ξ – параметры системы; $\Phi_0(\xi r)$, $\Phi_N(\xi r)$ – потенциал, создаваемый наименьшим и наибольшим кольцами, соответственно. Потенциал исследуется вдоль прямой, проходящей через начало координат и образующей с осью Oz угол θ .

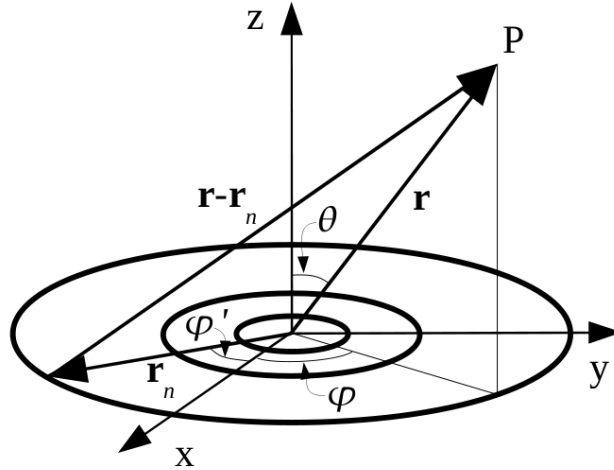


Рисунок 9. На рисунке изображена система концентрических колец, которая нами использована в качестве модели плоского дендритного кластера. Все кольца расположены в горизонтальной плоскости. Их радиус и заряд подчиняются соотношениям $r_n = r_0 \xi^n$, $e_n = e_0 \xi^n$, соответственно, где n – номер текущего кольца $0 \leq n \leq N-1$, r – радиус-вектор, проведенный из начала координат в точку P .

Уравнение (2) удастся решить и показать, что вблизи центра кластера в области $r_0 \ll r \ll r_{N-1}$, где r_0 , r_{N-1} – радиусы наименьшего и наибольшего колец, соответственно, существенный вклад вносит слагаемое, содержащее произведение дробностепенной функции на функцию, периодическую в логарифмических координатах (3)

$$\Phi(x) = x^\nu w_\nu(\ln x) + g(x), \quad (3)$$

где x – величина радиус-вектора, нормированная на радиус кластера (r_{N-1}); $\nu = \ln b / \ln \xi - 1$; $w_\nu(\ln x)$ – логопериодическая функция, $w_\nu(\ln x \pm \ln \xi) = w_\nu(\ln x)$; $g(x)$ – поправка к решению, которая сказывается преимущественно на границах интервала (рис. 11, б).

Из рис. 10 и 11 видно, что вклад от дробно-степенного слагаемого $x^\nu w_\nu(\ln x)$ может быть значительным. Важно так же отметить, что этот вклад, имеет принципиальное значение. Слагаемое x^ν , содержащее дробную степень, не может быть получено путем разложения в степенной ряд. Это слагаемое является

следствием самоподобной и дискретной структуры распределения заряда в рассматриваемой системе.

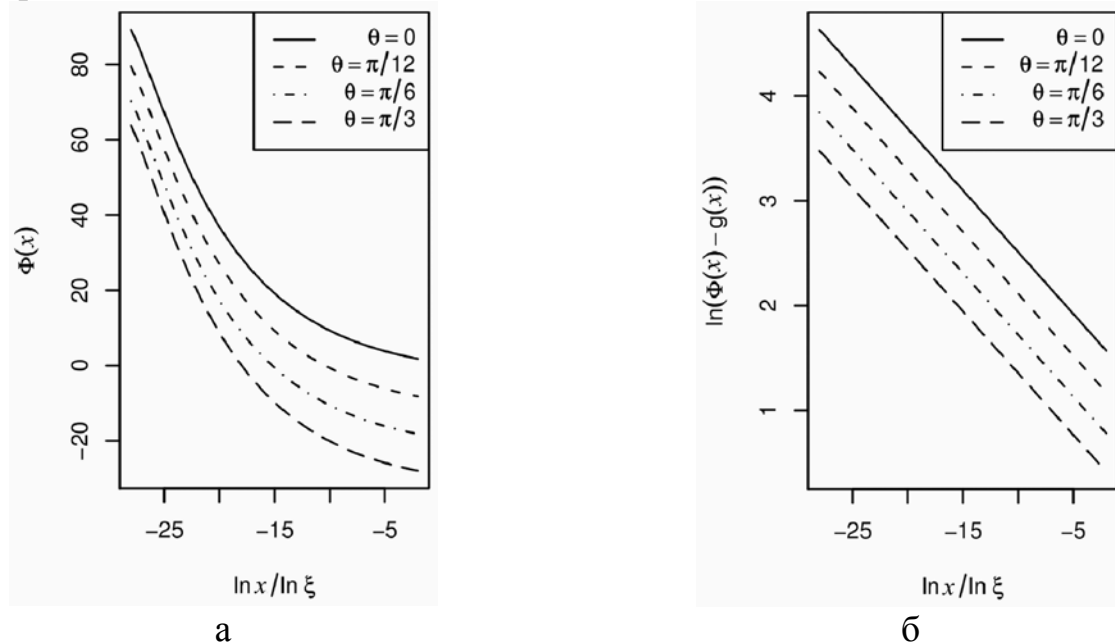


Рисунок 10. Зависимость потенциала от расстояния до начала координат для набора параметров $\xi = 1,8$, $b = 1,6$, $N = 30$ при нескольких значениях угла θ . Чтобы кривые не накладывались друг на друга они были сдвинуты по оси Oy (слева). Дробно-степенное слагаемое потенциала. Чтобы кривые не накладывались друг на друга они были сдвинуты по оси Oy (справа).

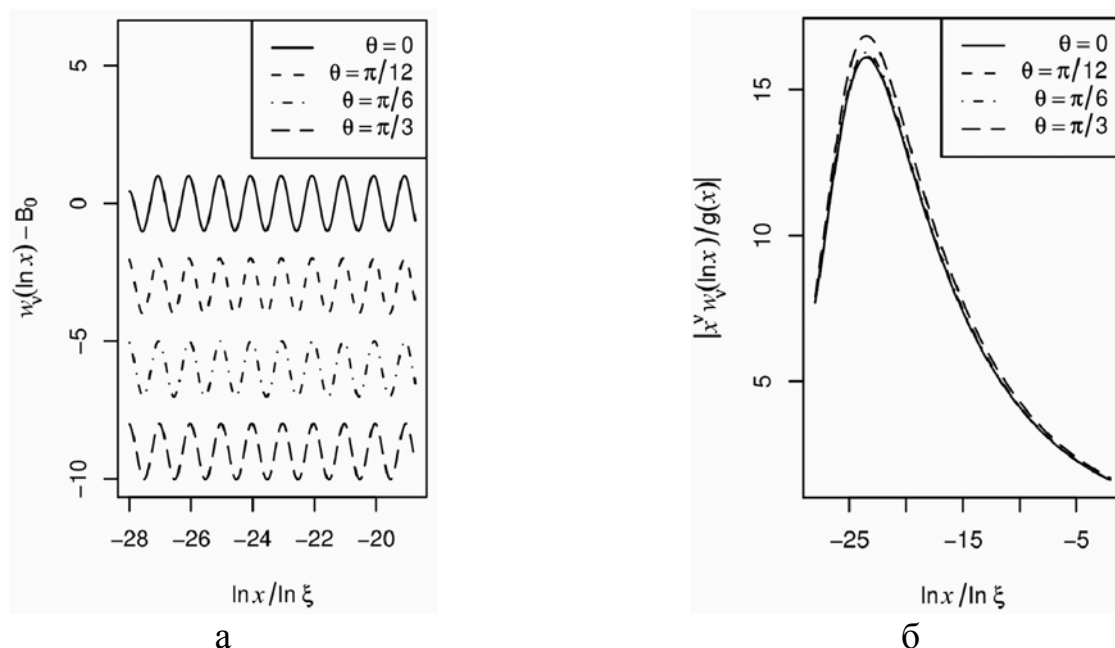


Рисунок 11. Нормированная функция $w_v(\ln x) - B_0$, $B_0 = \langle w_v(\ln x) \rangle$ потенциала. Чтобы кривые не накладывались друг на друга они были сдвинуты по оси Oy (слева). Доля вклада в полный потенциал со стороны дробнестепенного слагаемого, представленная в виде $|x^v w_v(\ln x) / g(x)|$ при $b > 0$ и фиксированного набора углов. Хорошо видна область, в которой вклад со стороны дробно-степенного слагаемого значителен, несмотря на малость амплитуды самой функции $w_v(\ln x)$ (справа).

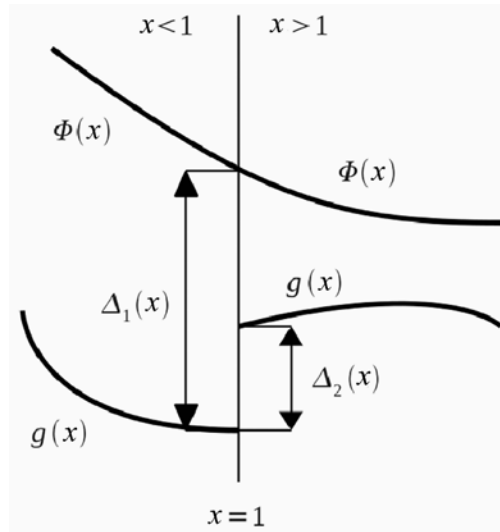


Рисунок 12. Скачкообразное поведение функции $g(x)$ при переходе через значение $x=1$. Величины Δ_1 и Δ_2 , характеризующие скачок, для всех допустимых значений угла θ с высокой точностью равны друг другу. Это приводит к эффекту «запирания» дробно-степенного слагаемого внутри сферы единичного радиуса. Данный эффект является следствием упрощений, допущенных в модели, а именно: замены реального плоского кластера системой заряженных концентрических колец.

Важно отметить, что слагаемое $x^\nu w_\nu(\ln x)$ исчезает при переходе значения $x=1$. Такой неожиданный результат может удивить, но он является следствием принятых упрощений (плоский фрактальный кластер заменяется системой заряженных концентрических колец). Если кольца заменить на кольцевые слои (по аналогии со сферическими слоями) шириной $\Delta r_n = \Delta r_0 \xi^n$ при условии, что $\Delta r_n / r_n \ll 1$, то появляется переходная область шириной $\Delta r_0 \xi^n$. Это легко понять, если представить себе, что каждый кольцевой слой разделен на $m \gg 1$ слоев, которые приближенно можно считать окружностями. В результате такого разбиения мы получим m вложенных систем заряженных концентрических колец с различными r_0 и e_0 . Для каждой системы колец мы имеем скачкообразное поведение $g(x)$ в определенной точке x , но эти точки равномерно распределены в интервале $[1 - \Delta r_0 / r_0; 1]$. В пределе, при $m \rightarrow \infty$, получаем плавное затухание слагаемого $w_\nu(\ln x)$.

Во второй части главы рассматривается дипольная система, образованная двумя подсистемами заряженных колец, расположенных в горизонтальных плоскостях. Расстояние между плоскостями (h) много меньше размера наименьшего кольца. Новым для этой системы, по сравнению с предыдущим случаем, является уменьшение показателя ν на единицу.

В третьей части главы рассматривается система, состоящая из 100 таких «кластеров» различных размеров, расположенных на квадратной подложке с длиной стороны 10 (в единицах радиуса наибольшего кластера) (рис. 13). Граничные условия подложки устанавливаются периодическими. Усредненный потенциал, создаваемый такой системой вдоль вертикальных прямых, проходящих через центры кластеров приведен на рис. 14, а. Вблизи поверхности подложки он

определяется дробностепенным слагаемым (рис. 14, б), а на расстояниях порядка размера подложки переходит в потенциал точечного диполя.

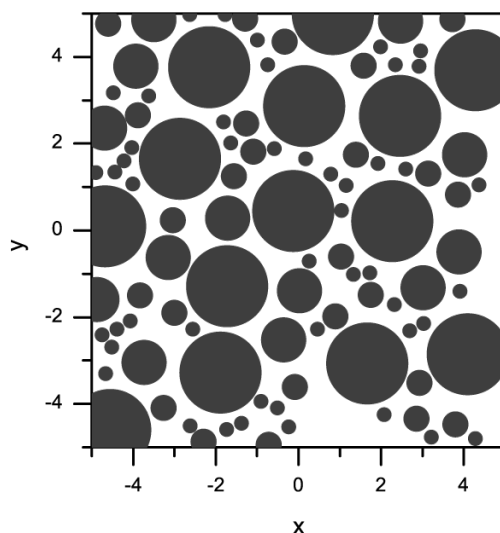


Рисунок 13. Схематично представлено расположение 100 кластеров на подложке размера $L_x \times L_y = 10 \times 10$. Наибольшие кластеры имеют радиус $R=1$, кластеры меньшего размера $R=1/\xi$ и т.д. На подложке при размещении кластеров были использованы периодические граничные условия.

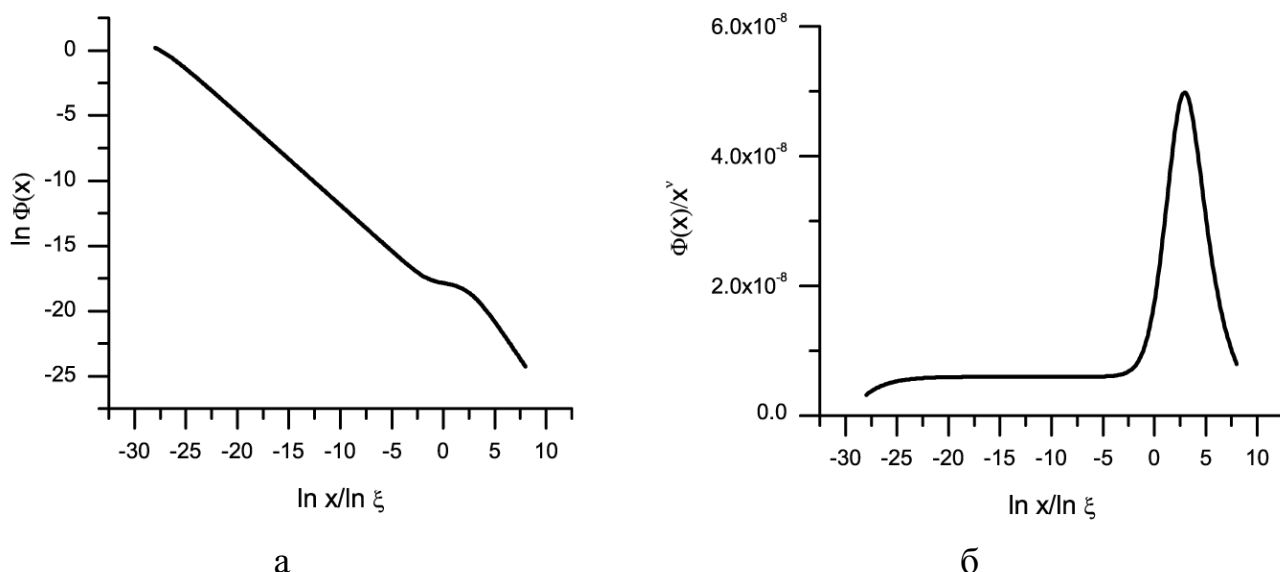


Рисунок 14. Усредненный потенциал, создаваемый кластерами подложки вдоль вертикальных прямых, проходящих через их центры хорошо аппроксимируется набором из трех прямых в дважды логарифмических координатах. Первая область ($\ln x / \ln \xi < -2$) отражает геометрию кластеров, вторая ($\ln x / \ln \xi \approx 0$) соответствует потенциалу, создаваемому распределением самих кластеров на подложке, третья – асимптотическому ($\ln x / \ln \xi > 2$) переходу потенциала подложки в потенциал точечного диполя (слева). Потенциал, умноженный на $x^{-\nu}$. Выход на плато соответствует области, в которой потенциал пропорционален x^ν (справа).

Таким образом, мы получаем непосредственную связь потенциала вблизи поверхности с самоподобной геометрией распределения заряда на поверхности. Особый интерес представляет обратная задача – отыскание параметров

распределения заряда исходя из потенциала, который создается этим распределением вблизи поверхности. При решении данной задачи на первом этапе необходимо выделить центры наибольших кластеров (рис. 15). На втором провести измерение потенциала вдоль вертикальных прямых, проходящих через центры найденных кластеров.

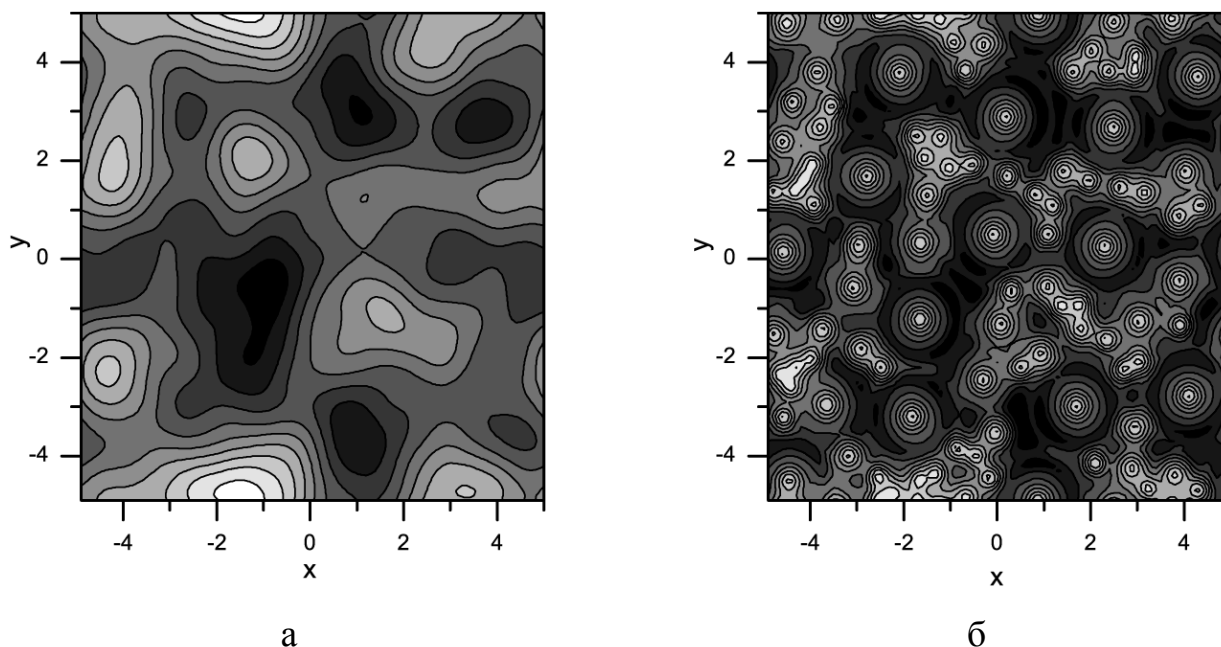


Рисунок 15. Потенциал в плоскости, расположенной от подложки на расстоянии равному радиусу наибольших кластеров. Светлые области соответствуют большему значению потенциала, темные – меньшему. Центры кластеров не видны (слева). Потенциал в плоскости, расположенной на расстоянии $1/\xi^3$ от подложки. Светлые области соответствуют большему значению потенциала, темные – меньшему. Центры кластеров хорошо различимы (справа).

Заключение содержит основные результаты проделанной работы.

Основные результаты диссертационной работы следующие:

1. Подтверждена применимость квазифрактального представления для анализа геометрической структуры широкого класса неупорядоченных систем.
2. Разработаны модели представления кластеров, позволяющие количественно анализировать влияние факторов роста кластеров на их геометрические особенности.
3. Показано, что самоподобное распределение зарядов/диполей на поверхности твердого тела (подложке) создает вблизи нее электростатический потенциал, содержащий произведение дробно-степенного слагаемого на функцию, периодическую в логарифмических координатах.
4. Предложен подход к анализу статистически самоподобного распределения зарядов/диполей на поверхности твердого тела, основанный на заданном электростатическом потенциале вблизи этой поверхности.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1) Nigmatullin R.R. Realization of the Riemann-Liouville integral on new self-similar objects. / R.R. Nigmatullin, **A.P. Alekhin** // In Books of abstracts "Fifth EUROMECH Nonlinear Dynamics Conference", Eindhoven University of Technology – 2005 – Netherlands – P. 175–176.

2) Nigmatullin R.R. Quasi-Fractals: New Possibilities in Description of Disordered Media / R.R. Nigmatullin, **A.P. Alekhin** // Advances in Fractional Calculus: Theoretical Developments and Application in Physics and Engineering; ed. by J. Sapatier, O.P. Agrawal, J.A. Tenreiro-Machado. – Berlin: Springer, 2007. – P. 377–388.

3) **Алехин А.П.** Численное моделирование и исследование свойств малых кластеров, обладающих нетривиальными масштабно-инвариантными свойствами. / А.П. Алехин // Четырнадцатая всероссийская конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-14): Тез. Докл. – 2008. – г. УФА – С. 220–221.

4) **Алехин А.П.** Численное моделирование и исследование свойств малых кластеров, обладающих нетривиальными масштабно-инвариантными свойствами / Тез. Докл. Научно-образовательной конференции студентов. - Казань. - КГУ - 2008 г. – С. 104.

5) **Алехин А.П.** Новые методы параметризации и количественного прочтения двумерных дипольных кластеров / А.П. Алехин // Пятый международный междисциплинарный симпозиум ФиПС «Фракталы и прикладная синергетика в нанотехнологиях»: сборник трудов. – 17-20 Ноября 2008г. – г. Москва. – С. 104–107.

6) Нигматуллин Р.Р. Новые методы параметризации и количественного анализа плоских дипольных кластеров / Р.Р. Нигматуллин, **А.П. Алехин** // Вестник Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева. – 2008. – № 4. – С. 21–25.

7) **Алехин А.П.** Нетривиальные масштабно-инвариантные свойства дипольных кластеров / А.П. Алехин // Химическая физика. – 2009. – Т. 28, № 7. – С. 24–27. (**Alekhin A.P.** Dipole clusters with nontrivial scale invariant properties / A.P. Alekhin. // Russian Journal of Physical Chemistry B. – Vol. 3. – № 4. – 2009. – P. 537–540).

8) Nigmatullin R.R. Calculation of a static potential created by plane fractal cluster / R.R. Nigmatullin, **A.P. Alekhin** // 3rd Conf. on Nonlinear Science and Complexity – 28–31 July 2010 – Ankara, Turkey.

9) Nigmatullin, R.R. Calculation of a static potential created by plane fractal cluster / R.R. Nigmatullin, **A.P. Alekhin** // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulations. – 2011. – V. 16, № 12. – P. 4649–4656.

10) **Алехин А.П.** Квазифракталы: новые возможности при описании самоподобных кластеров / А.П. Алехин // НФХМ. – 2012 – Т. 3, № 2. – С. 1–8.

11) **Алехин А.П.** Электростатический потенциал дипольных фрактальных кластеров. / А.П. Алехин // Наноматериалы и нанотехнологии. – 2012 – № 1. – С.1–7.

Цитированная литература

1. **Ван Кампен Н.Г.** Стохастические процессы в физике и химии / Н.Г. Ван Кампен – М.: Высшая школа – 1990 – 375 с.
2. **Арбузов А.А.** Теория и методы анализа диэлектрических спектров, описываемых дробно-степенными выражениями с действительными и комплексно-сопряженными показателями: дисс. к.ф.-м.н.: 01.04.02 защищена 22 дек. 2009 / Арбузов Андрей Александрович – Казань 2009 – 140 с.
3. **Потапов А.А.** Фракталы в радиофизике и радиолокации: Топология выборки. / А.А. Потапов. Изд. 2-е, перераб. и доп. – М.: Университетская книга, 2005. – 635 с.
4. **Учайкин В.В.** Метод дробных производных / В.В. Учайкин. – Ульяновск: Артишок, 2008. – 512 с.
5. **Mandelbrot B.B.** How long the coast of Britain? Statistical self-similarity and fractal dimension / B.B. Mandelbrot // Science – 1967 – Vol. 155. – P. 636–638.
6. **Mandelbrot B.B.** Intermittent turbulence in self-similar cascades: Divergence of high moments and dimension of the carrier. / B.B. Mandelbrot // J. Fluid Mech. – 1974 – Vol. 62 – P. 331–358.
7. **Mandelbrot B.B.** Stochastic models of the Earth's relief, the shape and the fractal dimension of the coastlines, and the number-area rule for islands. / B.B. Mandelbrot // Proc. Natl. Acad. Sci. USA – 1975 – Vol. 72. – P. 3825–3828.
8. **Мандельброт Б.Б.** Фрактальная геометрия природы / Б.Б. Мандельброт. – М.: Институт компьютерных исследований, 2002. – 656 с.
9. **Mandelbrot B.B.** Deviation from self-similarity in plane DLA and the “infinite drift” scenario. / B.B. Mandelbrot, H. Kaufman, A. Vespignani, I. Yekutieli and C.H. Lam // Europhys. Lett. – 1995 – Vol. 29, № 8, P. 599–604.
10. **Witten T.A.** and Sander, L.M. Diffusion-limited aggregation a cinetical critical phenomena // Phys. Rev. Lett. – 1981. – V. 47, № 19. – P. 1400-1403.
11. **Meakin P.** Formation of fractal clusters and networks by irreversible diffusion-limited aggregation / P. Meakin // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V. 51. – P. 1119–1122.
12. **Brown W.D.** Computer simulation of chemically limited aggregation / W.D. Brown, R.C. Ball // J. Phys. A – 1985 – V. 18, № 9 (L517) – P. 1–9.
13. **Meakin P.** Reaction-limited cluster-cluster aggregation in dimensionalities 2-10 / Meakin P. // Phys. Rev. A – 1988 – V. 38. – P. 4799–4814.
14. **Kok J.F.** Electrification of granular systems of identical insulators / J.F. Kok, D.J. Lacks // Phys. Rev. E – 2009 – Vol. 79, № 051304. – P. 1–4.
15. **Baytekin H.T.** The mosaic of surface charge in contact electrification / H.T. Baytekin, A.Z. Patashinski, M. Branicki, B. Baytekin, S.Soh and B.A. // Science – 2001 – Vol.333 – P.308–312.
16. **Суслов, А.А.** Сканирующие зондовые микроскопы (обзор) / А.А. Суслов, С.А. Чижик // Материалы, Технологии, Инструменты. – 1997 – Т. 2, № 3. – С. 78–89.
17. **Kornyshev A.A.** Electric field of fractal clusters. / A.A. Kornyshev and M.A. Vorotyntsev // Physica A – 1991. – V. 171, № 1. – P. 98–119.
18. **Tarasov E.V.** Electromagnetic field of fractal distribution of charged particles / E.V. Tarasov // Physics of plasmas – 2005. – V. 12, № 8 (082106) – P. 1–9.

19. **Nigmatullin R.R.** Eigen-Coordinates: New Method of Analytical Functions Identification in Experimental Measurements / R.R. Nigmatullin // Appl. Magnet. Resonance. – 1998. – Vol. 14. – P. 601–633.